

# 福井大学研究シーズデータ

名前・学部・学科等	玉井 良則・工学部・物理工学科				
研究情報の分類	シーズ	特許	新製品	分析/解析	調査
研究分野の分類	1 (3,4,9)	以下の18項目から一つ選び番号を左欄に記入する。 1.物理系 2.エネルギー系 3.化学系 4.バイオ系 5.環境系 6.海洋・宇宙系 7.交通系 8.機械系 9.材料系 10.電子・電気系 11.情報系 12.建築・建設系 13.医学系 14.健康・保険系 15.看護・福祉系 16.農業・林業系 17.水産・畜産系 18.その他			
重点研究分野への該当	I T	ナノ	バイオ	環境・エネルギー	その他
キーワード(5個以内)	シミュレーション	材料設計	機能性膜	生体分子	計算科学
研究情報の名称	計算機シミュレーションによるサブナノスケールサイエンスの確立				
<p>概要</p> <p><u>ナノおよびサブナノメートルスケールの分子構造や電子状態を高度に制御する技術の開発が、今後、さまざまな研究分野において非常に重要になると考えられる。これを実現するためには、分子シミュレーション法や分子軌道法などの計算物理、計算化学的手法が極めて有用である。これまでに、分子シミュレーションソフトウェア PAMPS の開発をおこない、これを、生物・生命科学、材料開発、物理工学などの様々な分野の問題に適用し、計算科学的手法によるナノ・サブナノスケールサイエンスの手法の確立をめざして研究を進めている。</u></p> <p>具体的には、以下のテーマについて研究を推進している。</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. 分子キャビティーを利用した「スマートメンブレン」の分子設計と機能予測をおこない、分離性能の飛躍的な向上を図る。</li><li>2. 高分子結晶科学の新展開を目指したシミュレーション手法を開発する。</li><li>3. 水と生体分子が織り成す種々の生命現象について、分子レベルの仕組みを物理化学的観点から明らかにする。</li></ol>					
<p>グラフィカルな社会還元までのチャート</p>					
関連している企業・大学・団体等	科学研究費補助金 特定領域研究(京大, 名工大, 分子研 etc.)				
関連する特許1件	該当なし				
関連する論文1編	Y. Tamai, M. Fukuda, Polymer 44, 3279 (2003)				